



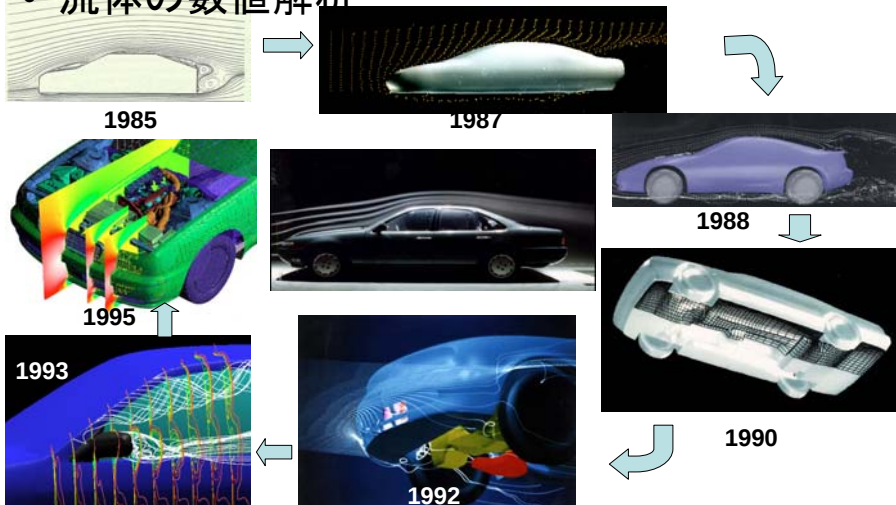
ペタ超級スーパーコンピュータに よる生体・生命現象への挑戦

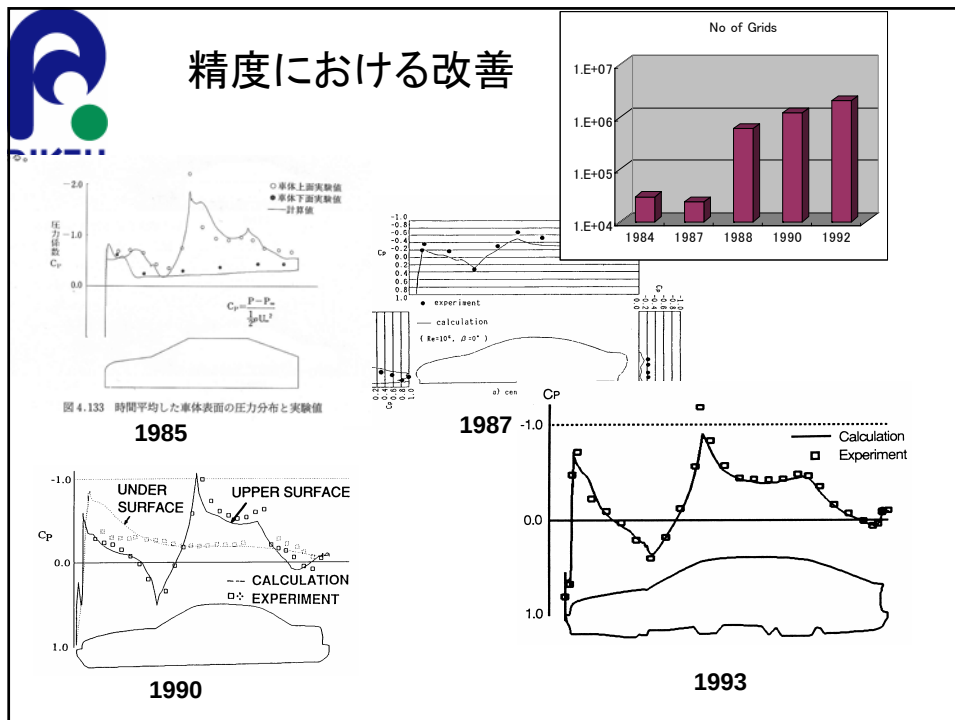
理化学研究所
姫野龍太郎



私のバックグラウンド

• 流体の数値解析





私自身の経験から

- 10年間の進歩は想像以上
- 夢見ることが実現のために必要
- 計算方法の進歩は精度、計算時間両方で重要



性能向上は何に使う？

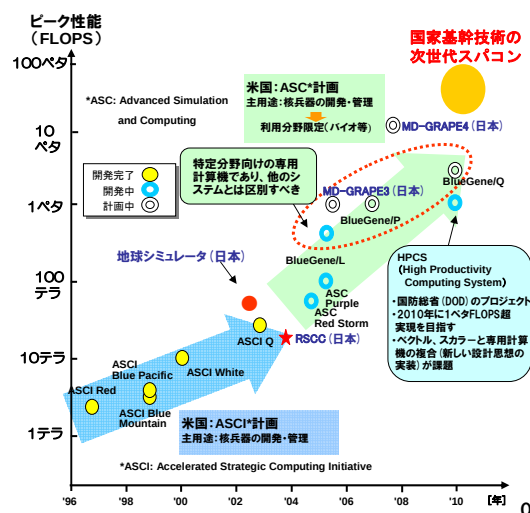
- 例えば流体の計算
 - 各方向2倍のメッシュ→8倍の計算点→時間方向も倍の計算量があるので、16倍の計算量 n^4
 - 100倍の性能向上→各方向3.16倍の密度向上
- 普通の研究では
 - 普通の大きさの計算でパラメータをいくつも変えて計算、変化を調べる
 - たった一つの計算だけができれば良いのではない

世界最速は必要か？

- 世界最速を10年に1回とるより、数年ごとに性能向上を図る、あるいはより広い使われ方をする方が得策
 - 研究者の育成
 - 利用技術の向上
 - 産業界への普及
- ただし、世界でここだけしかできない計算を可能にすることは価値あり

国家基盤技術としてスパコン開発を推進

- 2010年
10PetaFLOPS: 地球シミュレータの250倍
- 従来の延長上では、電力150MW、スペース75,000m²
- 何かの分野に特化した計算機となる必然





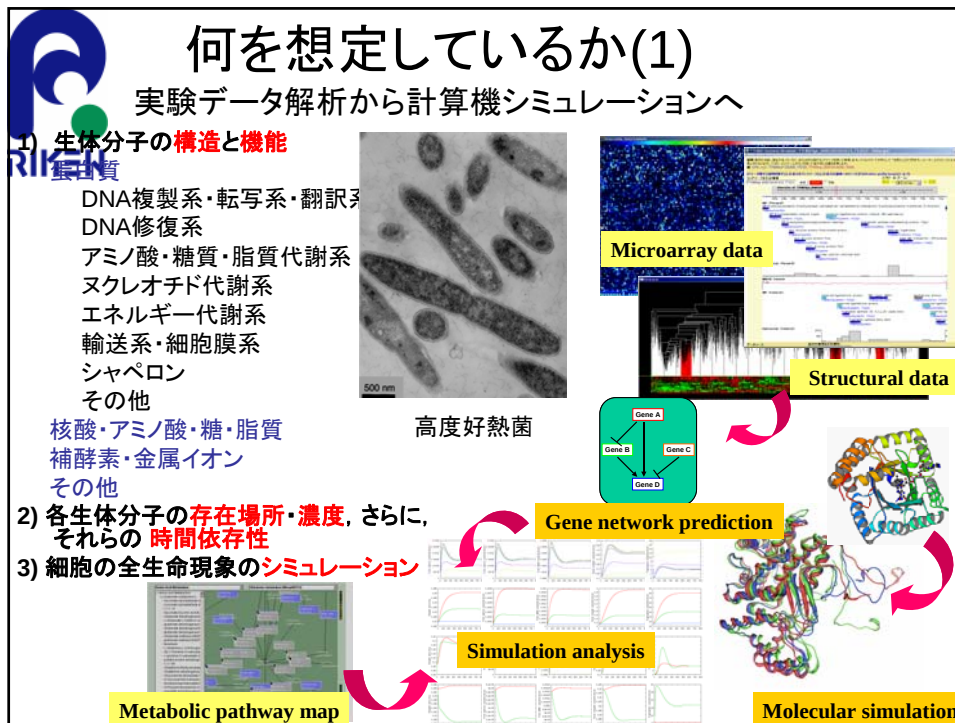
性能向上は何に使うか？

- ある分野に特化した世界最速の計算機：新しい研究ツール
 - 世界でここだけしかできない計算
 - まだ、誰も手がけていない計算
 - これまで不可能だと思われてきた計算
- 従来規模の計算は、従来の大学計算機センター、研究所の計算機を利用
- 教育センターを併設
- 産業利用は促進



従来の計算機では不十分な計算

- バイオ・ナノの第一原理計算、量子化学計算
- うまいければ
 - 新薬の開発、新材料・触媒の開発
 - 生命現象そのもののコンピュータシミュレーション

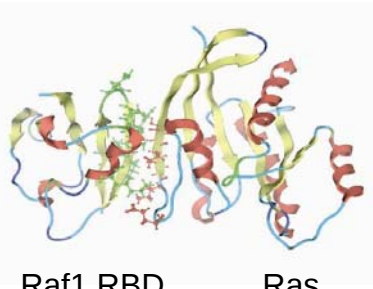


10PetaFLOPSで可能になること

- タンパク質の機能解析
 - 100万原子でも1日に20ナノ秒計算可能 (Direct)
- フォールディング
 - $N=10^4$
 - 合計シミュレーション時間 ~1ミリ秒/1.2週間
 - 比較的速くフォールドするタンパク質であれば、その過程を調べられる
- 高精度 *in Silico* スクリーニング
 - 5000 サンプル/日



変異蛋白質-蛋白質相互作用: Ras-Raf1 RBD/RalGDS complex



Raf1 RBD

Ras

- 変異により、結合能がどう変化するか
- Ras-Raf1 RBD, Ras-RalGDS
- Ras: 野生型 & 変異型
 - Glu37Gly – Raf1 RBD
 - Ile36Ala – RalGDS
- 50,000 原子
- 10 ns simulations
 - 2600h/run/CPCI MDGRAPE2
- GSCタンパクG 白水TL、横山PDとの共同研究

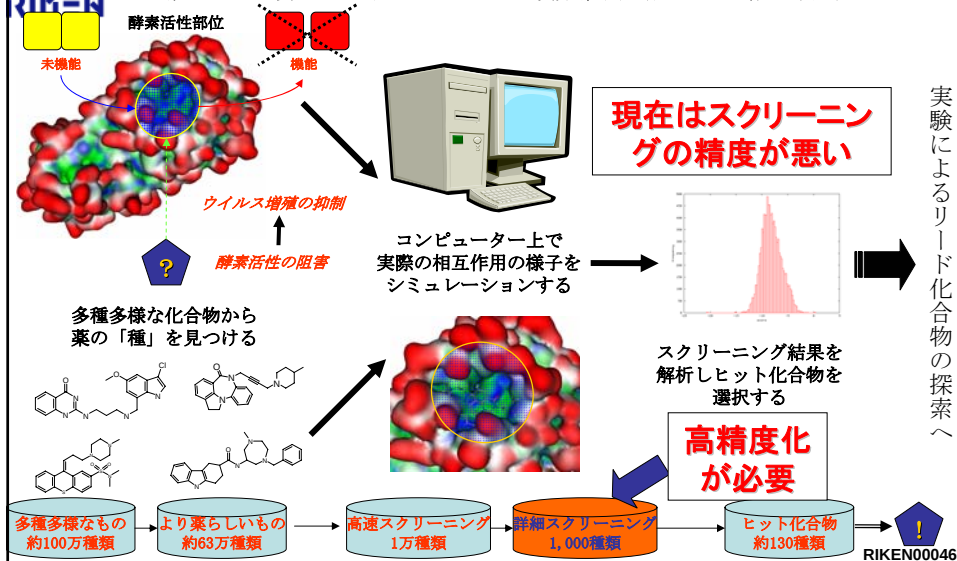
N. Futatsugi et al., *in preparation*.

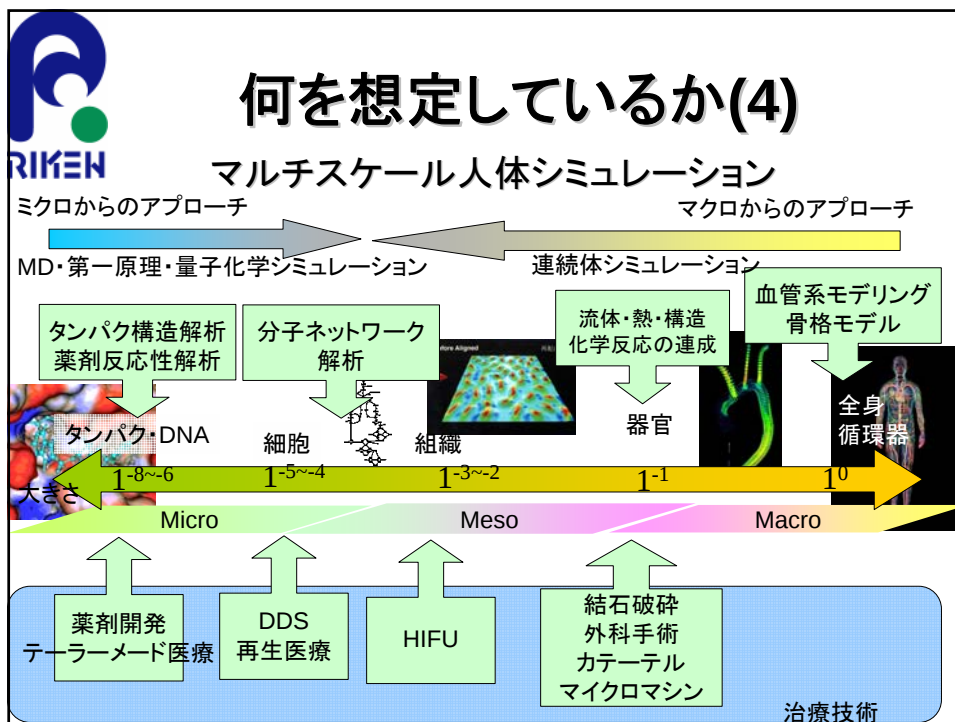
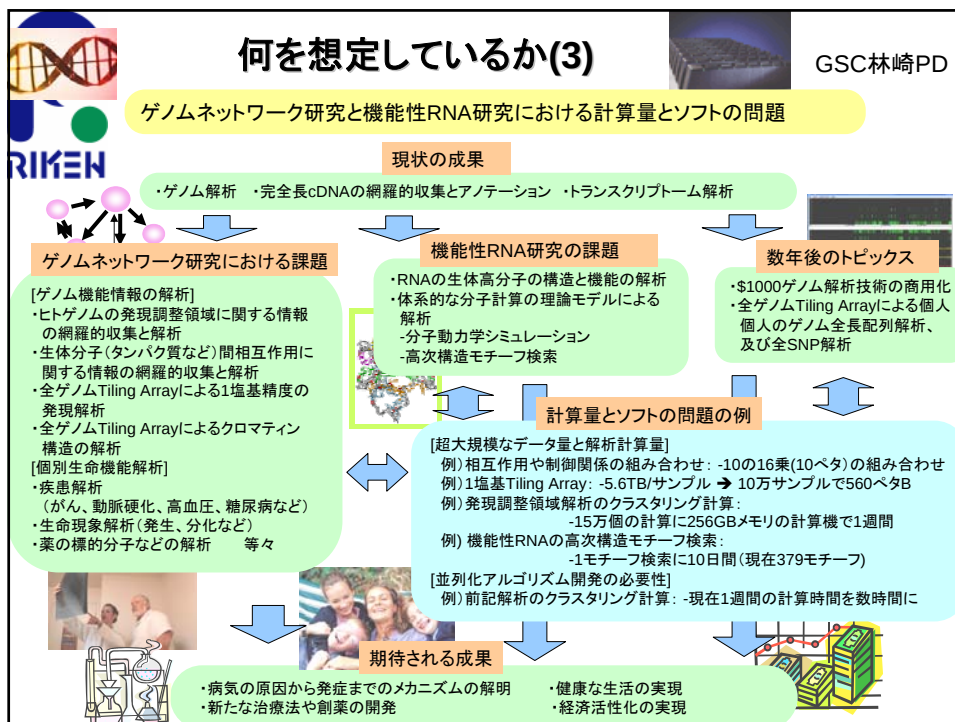


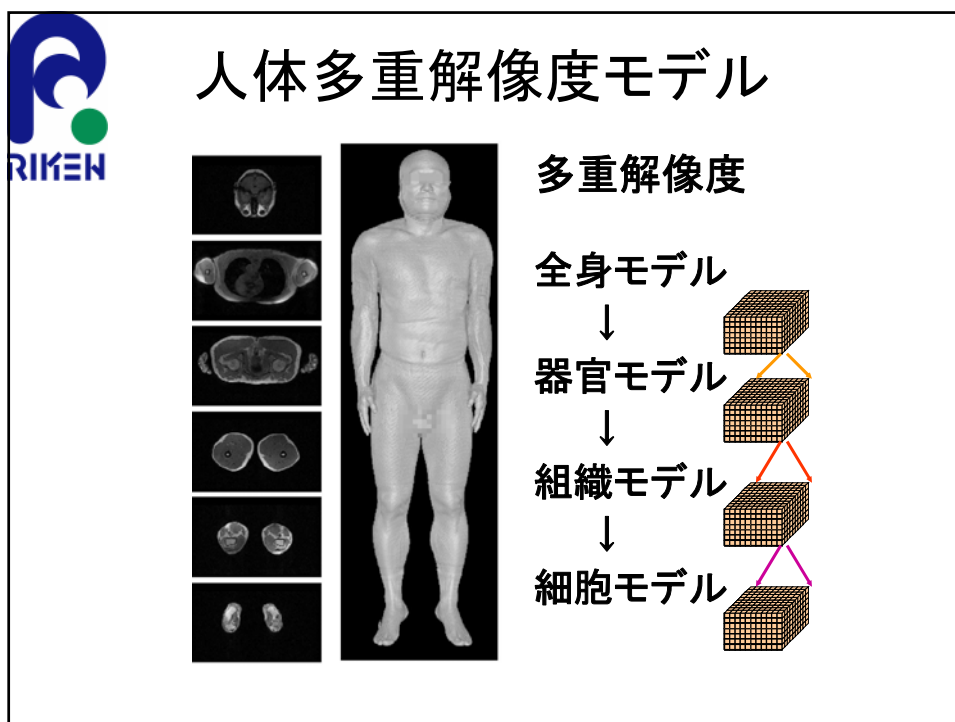
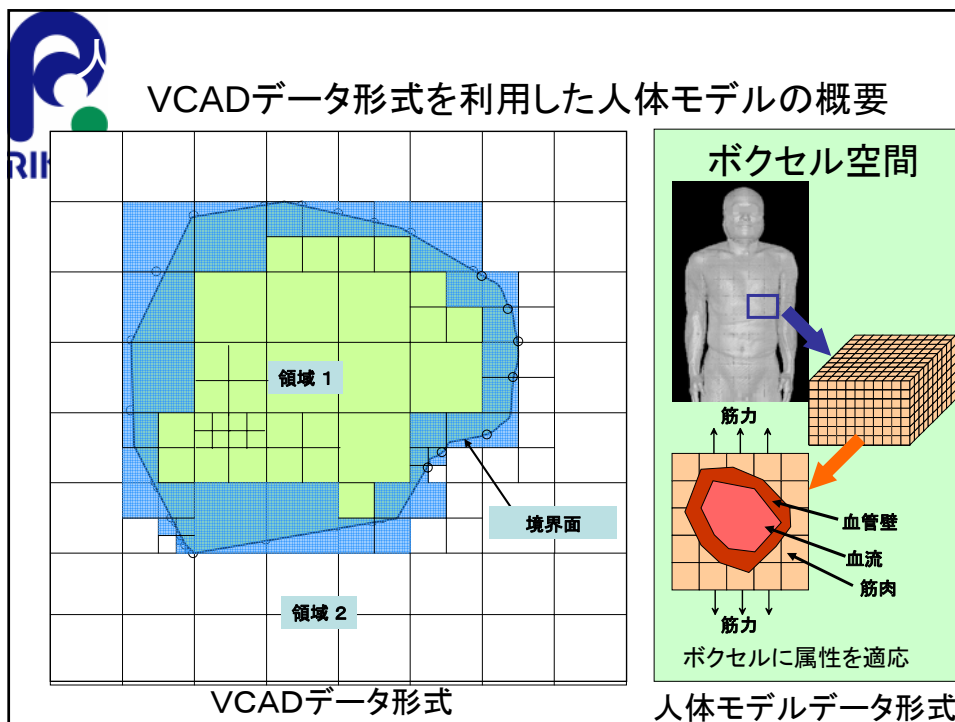
何を想定しているか(2)

In silico スクリーニングによるヒット化合物の探索

標的タンパク質: SARSウイルス タンパク質分解酵素 (ウイルスの増殖に関与)

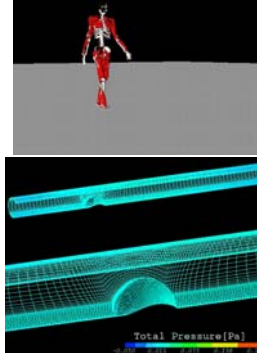
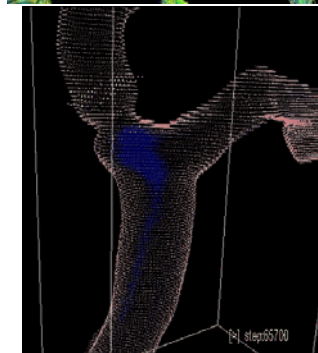
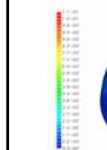


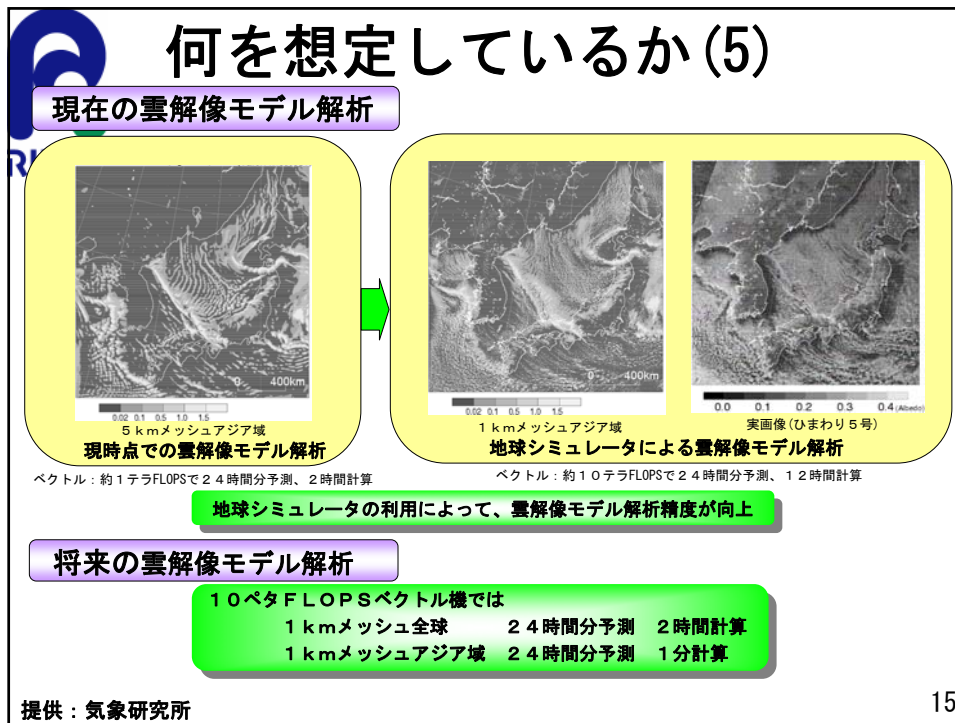




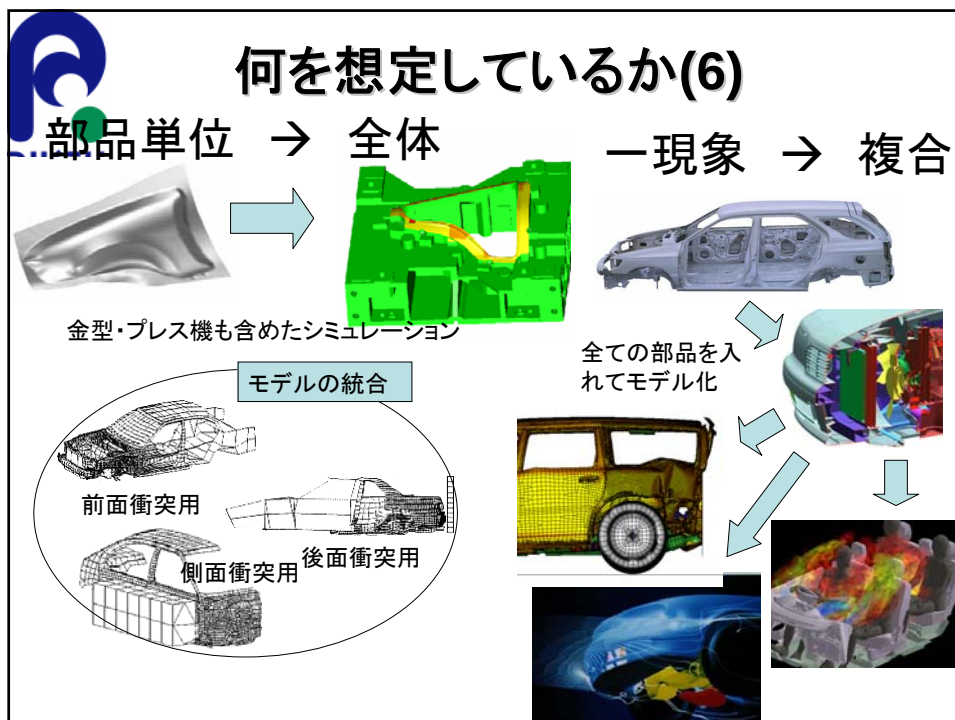


- RIMEN**





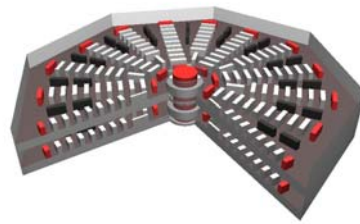
15





現時点での目標

- 理論ピーク性能
 - 10 Peta FLOPS
- 実効性能
 - 各種のアプリケーションで1.0 PetaFLOPS以上
- Memory 0.75PB
- 45 nm processing technology
- 光通信、光スイッチ
- 消費電力
 - 35MW
 - コージェネによる発電:14MW
 - 蒸気炊き吸収式冷凍機の利用
- 設置延べ面積:10,000平方m



仮称)先端計算科学技術センタ

- 計算機運用とユーザーサポート
 - ネットワークからの利用を想定
 - ソフトの最適化
 - 産業界からの利用も想定
- 利用アプリの開発、研究
- 設置場所:未定
- 研究開発:次機種を継続的に開発、研究と教育の拠点



想定利用

- ここでしか動かない計算
- 結果が公表可能であれば無償
- 直接費を負担すれば結果を公表しなくても良い(私企業からの利用を想定)
- 課題選定は国が行う(理研とは独立)
- 海外からの利用も排除しない



まとめ

- 理化学研究所でライフ・ナノ・サイエンスの研究進展と、それ以外の領域でも十分な能力を発揮できるような複合計算機システム構想をまとめた。
- 2006年1/1、理研に次世代スーパーコンピュータ開発実施本部設置。現在、この構想実現に取り組んでいる。
- グランドチャレンジ問題としてナノとライフサイエンスが設定されている
- この内の次世代生命体統合シミュレーションに生体力学シミュレーション特別研究ユニットからの貢献が期待されている